Index

Pagina

Commentationes et Relationes

ADAMS, O. W., and R. L. MILLER: An Improved LCAO-MO-SCF π-Electron Method. II. Hydrocarbons and Nitrogen and Oxygen Heterocycles 151
ALLINGER, N. L., and J. C. TAI: Further Theoretical Studies of the Structure and Electronic Spectrum of Cyclobutadiene 29
— see TAI, J. C. 261

BALLHAUSEN, C. J., see DUINKER, J. C. 325
BENSTON, M. L., see CHONG, D. P. 175
BILLINGSLEY, II, F. P., see BLOOR, J. E., et al. 360
BLOOR, J. E., B. R. GILSON, and F. P. BILLINGSLEY, II: Valence-Shell Calculations on Polyatomic Molecules. III. The Calculation of Dipole Moments and the Structure of Sydnone 360
BOCK, H., s. KRONER, J. 214
BROWN, R. D., and F. R. BURDEN: Optimum Parametrization of the Pople-Santry-Segal Method of Treating All Valence Electrons 95
BUENKER, R. J., and S. D. PEYERIMHOFF: CI Method for the Study of General Molecular Potentials 183
BURDEN, F. R., see BROWN, R. D. 95

CHANG, T.-C., see GREIN, F. 243
CHOJNACKI, H.: Electronic Spectrum and π-Electron Delocalization of Imidazole. Their Relation to the Electrical Conductivity 373
CHONG, D. P.: On the Method of Solving Constrained Secular Equations 337
—, and M. L. BENSTON: Parameters for Multiple Constraints 175
— see YUE, C. P. 431
CIAMPI, A., and L. PAOLONI: A Semiempirical Method Based on Geminal Functions. I. Extension of the Hückel Method to π- and n-Electrons 229
COHEN, M., and R. P. MCEACHRAN: Nuclear Repulsion Effects in Molecular Bonding 87
COULSON, C. A.: Note on an Integral of A. F. Saturno 341

DAS, T. P., see RETTIG, M. F., et al. 178
DENIS, A., and J.-P. MALRIEU: Influence of σ Systems on the $\pi\pi^*$ Transition Energies: A Simple Application to the Series of Linear Polyenes 66
DUINKER, J. C., and C. J. BALLHAUSEN: Low Temperature Absorption Spectra of $CrO_4^{=}$ in K_2SO_4 and $VO_4^{\equiv}$ in $Na_3PO_4 \cdot 12\,H_2O$ 325
DYADYUSHA, G. G., see KRUGLYAK, YU. A. 18

EDWARDS, T. G., and R. GRINTER: Molecules-in-Molecules Calculations on Some Conjugated Carbonyl Compounds 387

FABIAN, J.: MO-LCAO-Berechnungen an schwefelhaltigen π-Elektronensystemen. XVI. PPP-Berechnungen an Thiokohlensäurederivaten als gekreuzt konjugierte Systeme 200
—, K. FABIAN u. H. HARTMANN: MO-LCAO-Berechnungen an schwefelhaltigen π-Elektronensystemen. XX. PPP-Berechnungen an Mercapto-tropyliumion und iso-π-elektronischen Schwefel-heterocyclen 319

Pagina

Fabian, J., A. Mehlhorn und R. Zahradník: PPP-Berechnungen und Vergleich der Elektronenspektren von iso-π-elektronischen Sauerstoff-, Stickstoff-, Schwefel- und Selenheterocyclen 247
Fabian, K., s. Fabian, J., et al. 319
Feler, G.: Cyclisation du butadiène en modes corotatoire et disrotatoire 412
Fischer, H., u. H. Kollmar: Zur Invarianz in der LCAO MO Theorie 344
Fisk, C., see Thorhallsson, J., et al. 80
Fraga, S., see Thorhallsson, J., et al. 80

Gey, E., U. Havemann u. L. Zülicke: Zum C—H-Bindungsmoment von Methan, Äthan, Äthylen und Acetylen 313
Gilson, B. R., see Bloor, J. E., et al. 360
Gołębiewski, A., and H. Kowalski: Electronic Structure of Octacyanides of Molybdenum IV and V According to the SCCC MO Method. The D_{4d} Case 293
Grein, F., and T.-J. Tseng: Correlated One-Center Wavefunctions for Two-Electron Molecules. II. Configuration-Interaction Functions and Application to HeH^+ 57
— Chang, T.-C.: Correlated One-Center Wavefunctions for Two-Electron Molecules. III. Correlated SCF Functions and Application to H_3^+ 243
Grinter, R., see Edwards, T. G. 387

Han, P. S., see Rettig, M. F., et al. 178
Hartmann, H., s. Fabian, J., et al. 319
—, W. Winkle u. M. Mitzlaff: Rotationsspektrum von Trichlorsilan in angeregten Schwingungszuständen 330
Havemann, U., s. Gey, E., et al. 313
Hensen, K., und W. Sarholz: Untersuchung der UV-Absorptionsspektren einiger Pyridin-Additionsverbindungen 206
Hosoya, H., S. Hosoya, and S. Nagakura: Electronic Structures of the Meisenheimer and Janovsky Complexes 117
Hosoya, S., see Hosoya, H., et al. 117

Kapuy, E.: Application of the Extended Separated Pair Theory to the π-Electrons of Trans-Butadiene without Zero Differential Overlap Approximation 397
Kochanski, E., see Levy, B. 138
Kollmar, H., s. Fischer, H. 344
Kowalski, H., see Gołębiewski, A. 293
Kroner, J., und H. Bock: „*d*-Orbital"-Effekte in Silicium-substituierten π-Elektronensystemen. XIV. Pariser-Parr-Pople- und "Extended Hückel"-Rechnungen an isomeren Disilyl- und Dialkyl-Butadienen 214
Kruglyak, Yu. A., and G. G. Dyadyusha: Torsion Barriers of End-Groups in Cumulenes. II. Results of Calculations and Discussion 18
— see Kventsel, G. F. 1
Kunii, T. L., see Yamaguchi, H., et al. 349
Kventsel, G. F., and Yu. A. Kruglyak: Local Electronic States in Long Polyene Chains 1

Ladd, M. F. C.: The Radii of Spherical Ions 333
Larcher, J. F., and J. W. Linnett: Boron-Boron Bonding in Pentaborane-9 127
Lehn, J. M., and B. Munsch: An *ab initio* SCF-LCAO-MO Study of the Nitrogen Inversion Barriers in Methylenimine, Diimide and Carbodiimide 91
Leibovici, C.: Etude théorique de derives substitués du benzène. I. Les monoalcoxybenzènes φOR 34
— Etude théorique de derives substitués du benzène. II. Les dialcoxybenzènes symétriques $\varphi(OR)_2$ 48

Pagina

Levy, B., et E. Kochanski: Calcul par double perturbation de l'interaction dipolaire spin-spin dans les molécules. Application aux états triplets d'hydrocarbures. . . . 138
Lin, S. H., see Zahrt, J. D. . . . 256
Linnett, J. W., see Larcher, J. F. . . . 127

Malrieu, J.-P., see Denis, A. . . . 66
McEachran, R. P., see Cohen, M. . . . 87
Mehlhorn, A., s. Fabian, J., et al. . . . 247
Miller, R. L., see Adams, O. W. . . . 151
Mitzlaff, M., s. Hartmann, H., et al. . . . 330
Munsch, B., see Lehn, J. M. . . . 91

Nagakura, S., see Hosoya, H., et al. . . . 117
Nakajima, T., see Yamaguchi, H., et al. . . . 349
Nikitin, E. E.: Quasistationäre Zustände in der konischen Potentialmulde 307
Paoloni, L., see Ciampi, A. . . . 229
Perkins, P. G.: Calculation of the U.V. Spectrum of *p*-Disilylbenzene 427
Peyerimhoff, S. D., see Buenker, R. J. . . . 183
Politzer, P., see Stout, jr., E. W. . . . 379

Rettig, M. F., P. S. Han, and T. P. Das: Calculation of Hyperfine Field and Quadrupole Splitting in Ferriprotoporphyrin IX Chloride (Hemin) 178

Sarholz, W., s. Hensen, K. . . . 206
Stout, Jr., E. W., and P. Politzer: An Investigation of Definitions of the Charge on an Atom in a Molecule 379

Tai, J. C., and N. L. Allinger: VESCF Calculations of the Spectra of Some Hydrocarbons Containing Triple Bonds 261
—, see Allinger, N. L. . . . 29
Thorhallsson, J., C. Fisk, and S. Fraga: Physical Properties of Many-Electron Atomic Systems Evaluated from Analytical Hartree-Fock Functions IX. Valence State Energies 80
Tinland, B.: Electronic Structure of Dioxazines 85
Tseng, T.-J., see Grein, F. . . . 57

Umanski, S. Ja., and A. I. Voronin: Asymptotic Calculation of Some Exchange Integrals 166

Veillard, A.: Gaussian Basis Set for Molecular Wavefunctions Containing Second-Row Atoms 405
Voronin, A. I., see Umanski, S. Ja. . . . 166

Wadia, W.: Vibrational Analysis of Free Nine-Atomic and Bound Five-Atomic Tetrahedral Molecules 104
Warren, K. D., and J. R. Yandle: SCF-π-Electron Calculations Using Orthogonalised Atomic Orbitals. I. An Assessment of a Recent Approach 267
—, — SCF-π-Electron Calculations Using Orthogonalised Atomic Orbitals. II. The Incorporation of Variable Bond Order and Variable Electronegativity Refinements 279
Winkle, W., s. Hartmann, H., et al. . . . 330

Pagina

YAMAGUCHI, H., T. NAKAJIMA, and T. L. KUNII: The Electronic Structures and Spectra of Nonbenzenoid Aromatic Hydrocarbons Containing the Cyclopropenyl Ring 349
YANDLE, J. R., see WARREN, K. D. 267
— see WARREN, K. D. 279
YUE, C. P., and D. P. CHONG: On the Use of Integral Electron Cusp Conditions as Constraints 431

ZAHRADNÍK, R., s. FABIAN, J., et al. 247

ZAHRT, J. D., and S. H. LIN: Exact Solution of an Electron Trapped in a Spherical Cavity and Applications to the *F* Center in Alkali Halides 256
ZÜLICKE, L., s. GEY, E., et al. 313

Theoretica Chimica Acta

For speedy publication, this journal is issued at frequent intervals, according to the amount of material received, 5 issues normally constituting one volume. Price per volume: DM 96.—.

It is a fundamental condition that manuscripts submitted should not have been published elsewhere, in this or any other country. The author must undertake not to publish elsewhere at a later date. With the acceptance of a manuscript for publication, the publishers acquire the sole copyright for all languages and countries, including all rights of photocopying or reproduction by any other method.

The use in this journal of registered or trade names, trademarks etc. without special acknowledgement does not imply that such names, as defined by the relevant protection laws, may be regarded as unprotected and thus free for general use.

Die Zeitschrift erscheint, um eine rasche Publikation zu ermöglichen, in einzelnen Heften, die zu Bänden vereinigt werden. Ein Band besteht im allgemeinen aus 5 Heften. Der Preis eines Bandes beträgt DM 96.—.

Grundsätzlich dürfen nur Arbeiten eingereicht werden, die vorher weder im Inland noch im Ausland veröffentlicht worden sind. Der Autor verpflichtet sich, sie auch nachträglich nicht an anderer Stelle zu publizieren. Mit der Annahme des Manuskriptes und seiner Veröffentlichung durch den Verlag geht das Verlagsrecht für alle Sprachen und Länder einschließlich des Rechts der fotomechanischen Wiedergabe oder einer sonstigen Vervielfältigung an den Verlag über. Jedoch wird gewerblichen Unternehmen für den innerbetrieblichen Gebrauch nach Maßgabe des zwischen dem Börsenverein des Deutschen Buchhandels e. V. und dem Bundesverband der Deutschen Industrie abgeschlossenen Rahmenabkommens die Anfertigung einer fotomechanischen Vervielfältigung gestattet. Wenn für diese Zeitschrift kein Pauschalabkommen mit dem Verlag vereinbart worden ist, ist eine Wertmarke im Betrage von DM 0,30 pro Seite zu verwenden. *Der Verlag läßt diese Beträge den Autorenverbänden zufließen.*

Die Wiedergabe von Gebrauchsnamen, Handelsnamen, Warenbezeichnungen usw. in dieser Zeitschrift berechtigt auch ohne besondere Kennzeichnung nicht zu der Annahme, daß solche Namen im Sinn der Warenzeichen- und Markenschutz-Gesetzgebung als frei zu betrachten wären und daher von jedermann benutzt werden dürften.

Afin d'assurer la publication la plus rapide possible, la revue paraît aux courts intervalles, dans la mesure des articles reçus. En générale un volume se compose de 5 fascicules. Le prix de chaque volume est de 96 DM.

L'attention est tout particulièrement attirée sur le fait qu'une fois le manuscript accepté et publié par les éditeurs, l'unique copyright pour tous pays et toutes langues leur est réservé. Ne doivent être en principe envoyés que les ouvrages qui n'ont jamais été et ne seront jamais publiés ni dans le pays même de l'auteur ni à l'étranger.

En outre, il n'est pas permis sans l'autorisation expresse des éditeurs de faire des reproductions photographiques, des microfilms, des microphotos, etc. . . ., des revues publiées, des communications individuelles ou d'extraits de ces dernières.

La reproduction dans cette revue de marques déposées, marques de fabrique, désignations de marchandises, etc., même sans indication spéciale, n'autorise pas à croire que ces noms définis par la législation commerciale sur les marques et la propriété industrielle puissent être laissés au libre usage de chacun.

Pagina

Commentationes

YAMAGUCHI, H., T. NAKAJIMA, and T. L. KUNII: The Electronic Structures and Spectra of Nonbenzenoid Aromatic Hydrocarbons Containing the Cyclopropenyl Ring 349

BLOOR, J. E., B. R. GILSON, and F. P. BILLINGSLEY II: Valence-Shell Calculations on Polyatomic Molecules. III. The Calculation of Dipole Moments and the Structure of Sydnone 360

CHOJNACKI, H.: Electronic Spectrum and π-Electron Delocalization of Imidazole.. Their Relation to the Electrical Conductivity 373

STOUT, JR., E. W., and P. POLITZER: An Investigation of Definitions of the Charge on an Atom in a Molecule 379

EDWARDS, T. G., and R. GRINTER: Molecules-in-Molecules Calculations on Some Conjugated Carbonyl Compounds 387

KAPUY, E.: Application of the Extended Separated Pair Theory to the π-Electrons of Trans-Butadiene without Zero Differential Overlap Approximation 397

VEILLARD, A.: Gaussian Basis Set for Molecular Wavefunctions Containing Second-Row Atoms 405

FELER, G.: Cyclisation du butadiène en modes corotatoire et disrotatoire. 412

Cyclisation of Butadiene by Co-Rotation and by Dis-Rotation

PERKINS, P. G.: Calculation of the U.V. Spectrum of *p*-Disilylbenzene 427

YUE, C. P., and D. P. CHONG: On the Use of Integral Electron Cusp Conditions as Constraints 431

Springer-Verlag, Berlin · Heidelberg · New York

Druck der Brühlschen Universitätsdruckerei, Gießen

Printed in Germany

Verantwortlich für den Anzeigenteil: Edgar Seidler, 1 Berlin 33, Heidelberger Platz 3